

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

VIŠJE RAČUNSKE METODE
7. naloga: Kvantni Monte Carlo

Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, april 2023

1 Algoritem

S pomočjo klasičnega Metropolisovega algoritma želimo izračunati opazljivke v kvantnih sistemih. Pogosto želimo izračunati particijsko funkcijo $Z(\beta)$ in pričakovane vrednosti opazljivk

$$Z(\beta) = \text{Tr}(e^{-\beta H}) , \quad (1)$$

$$\langle A \rangle = \frac{\text{Tr}(Ae^{-\beta H})}{Z} . \quad (2)$$

Za nerelativistično Hamiltonko oblike $H = T + V$, kjer je

$$T = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2}{\partial q_j^2} \quad (3)$$

$$V = V(\underline{q}) , \quad (4)$$

se, z dodajanjem kompletnega seta stanj in uporabo Trotterjeve formule, ekviparticijska vsota zapiše kot

$$Z(\beta) = \left(\frac{1}{2\pi\beta} \right)^{MN/2} \int \prod_{j=1}^M dq_j \exp(-E(\underline{q})) , \quad (5)$$

kjer je $E(\underline{q})$ energija polimera

$$E(\underline{q}) = \sum_{j=1}^M \frac{M}{\beta} (q_{j+1} - q_j)^2 + \frac{\beta}{M} V(q_j) . \quad (6)$$

Kvantni problem dimenzije D lahko sedaj rešujemo kot klasični problem dimenzije $D+1$, kjer smo dodali dimenzijo imaginarnega časa. Metropolisov algoritem implementiramo na naslednji način:

- Izberemo naključno konfiguracijo v imaginarnem času \underline{q}_j in ga spremenimo v $\underline{q}_j \rightarrow \underline{q}_j + \epsilon \underline{\xi}$, kjer je ϵ parameter modela in $\underline{\xi}$ naključen normiran vektor.
- Potezo sprejmemo z verjetnostjo $\min \left\{ 1, \frac{P_{\underline{q}_{j-1}, \underline{q}'_j} P_{\underline{q}'_j, \underline{q}_{j+1}}}{P_{\underline{q}_{j-1}, \underline{q}_j} P_{\underline{q}_j, \underline{q}_{j+1}}} \right\}$, kjer je

$$P_{\underline{q}_j, \underline{q}_{j+1}} = \exp \left(-\frac{M}{2\beta} (q_{j+1} - q_j)^2 - \frac{\beta}{M} V(q_j) \right) \quad (7)$$

verjetnost za prehod med konfiguracijama v imaginarnem času. Opazljivke, ki so diagonalne v pozicijski bazi potem enostavno izračunamo, tiste ki niso diagonalne pa izračunamo iz particijske funkcije, na primer:

$$\frac{\langle H \rangle}{N} = \left\langle \frac{M}{2\beta} - \frac{M}{2\beta^2 N} \sum_{j=1}^M (q_{j+1} - q_j)^2 + \frac{1}{MN} \sum_{j=0}^M V(q_j) \right\rangle \quad (8)$$

2 Rezultati

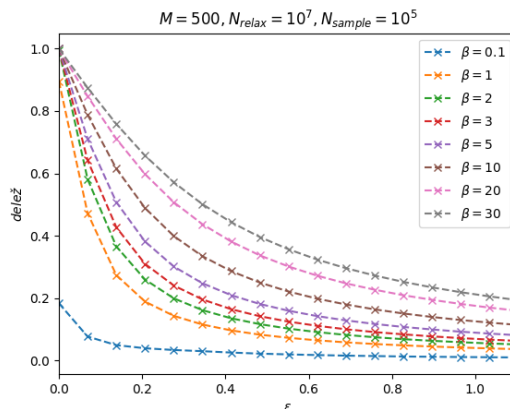
Izračune sem naredil v C++, grafe v Pythonu. Naključni vektor \underline{u}_ξ sem izžrebal po Normalni porazdelitvi $\mathcal{N}(0, 1/N)$. V nalogi je $N = 1$, saj preučujemo samo en oscilator. Zapisana koda dopušča obravnavo N oscilatorjev, vendar ni velikih razlik v primerjavi z obravnavo enega oscilatorja. Kot začetno stanje oz. začetni polimer sem vzel vektor velikosti M , sestavljen iz naključnih števil na intervalu $[-1, 1]$. Delovanje algoritma je odvisno od deleža sprejetih potez $n = N_{\text{accept}}/N_{\text{all}}$. Za dobro delovanje Metropolisja želimo delež okrog $n = 0.5$. Delež sprejetih potez je odvisen od velikosti koraka ϵ . Ker želimo da Metropolis deluje ob $n = 0.5$ je dobro vedeti odvisnost $\epsilon(\beta, M)$. Na nek način moram najprej kalibrirati metodo. Pri računanju rezultatov sem opzail, da večji M ne dajo vedno boljših rezultatov, kar je malo presenetljivo. Načeloma bi mislil, da večji M da boljšo natančnost Trotterjevega razcepa. Pri manjših β in velikih M se pojavijo težave, saj postane faktor M/β pri prožnostni energiji polimera zelo velik in začne energija divergirati. Koraki morajo biti zelo majhni, da kompenzirajo velik faktor M/β , kar pa pomeni, da je potrebno veliko korakov, da dobim osnovno stanje sistema. Zelo dobra implementacija algoritma bi bila tista v kateri bi spreminjal parameter $M(\beta)$ in $\epsilon(M(\beta), \beta)$, vendar sem se za naše potrebe omejil samo na odvisnost $\epsilon(\beta)$. Izkazalo se je (slika 2b), da pri velikih M ni tako velike odvisnosti $\epsilon(\beta)$, vendar se je potrebno zavedati, da so rezultati pri $\beta \rightarrow 0$ napačni. Algoritem najprej pustim N_{relax} korakov, da se relaksira in potem naredi N_{sample} korakov pri čemer povprečim vsak 3000-ti izmerek. Ponekod sem vzel vrednosti $N_{\text{relax}} = 10^7$, $N_{\text{sample}} = 10^5$, nekje pa sem dobil lepše rezultate, če vem vzel $N_{\text{relax}} = 10^6$, $N_{\text{sample}} = 10^6$.

2.1 Harmonski oscilator

Najprej obravnavamo harmonski oscilator

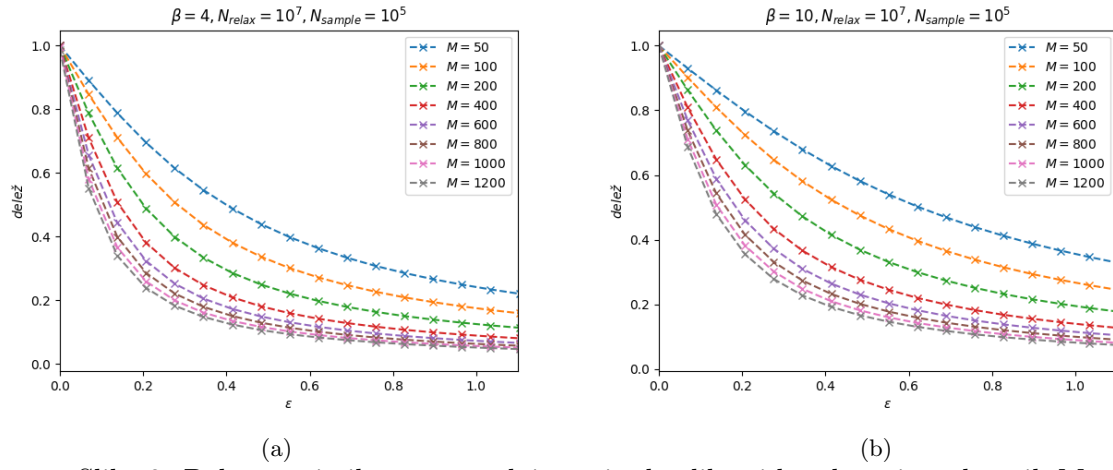
$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} q^2. \quad (9)$$

Najprej sem si pogledal delež sprejetih potez v odvisnosti od velikosti koraka pri različnih β (slika 1) in pri različnih M (slika 2). Kot sem omenil, pri velikih M , ϵ nima velike odvisnosti od M . Iz teh odvisnosti lahko dobim odvisnosti $\epsilon(\beta)$ in $\epsilon(M)$ (slika 3a,b). Za manjše β je simulacija z velikim številom M manj stabilna, vseeno pa je velik M ključen za pridobitev osnovnega stanja, sploh pri anharmonskem oscilatorju.

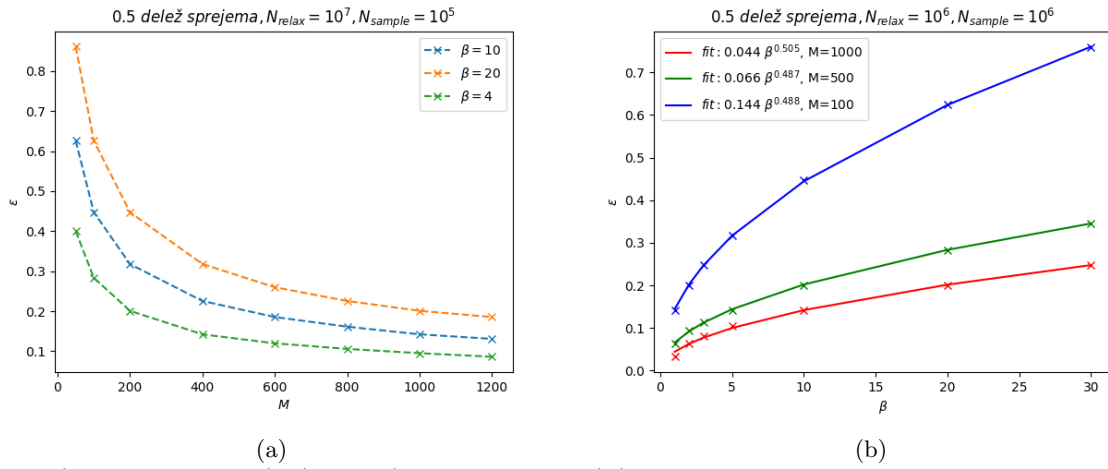


(a)

Slika 1: Delež sprejetih potez v odvisnosti od velikosti koraka pri različnih inverznih temperaturah β .

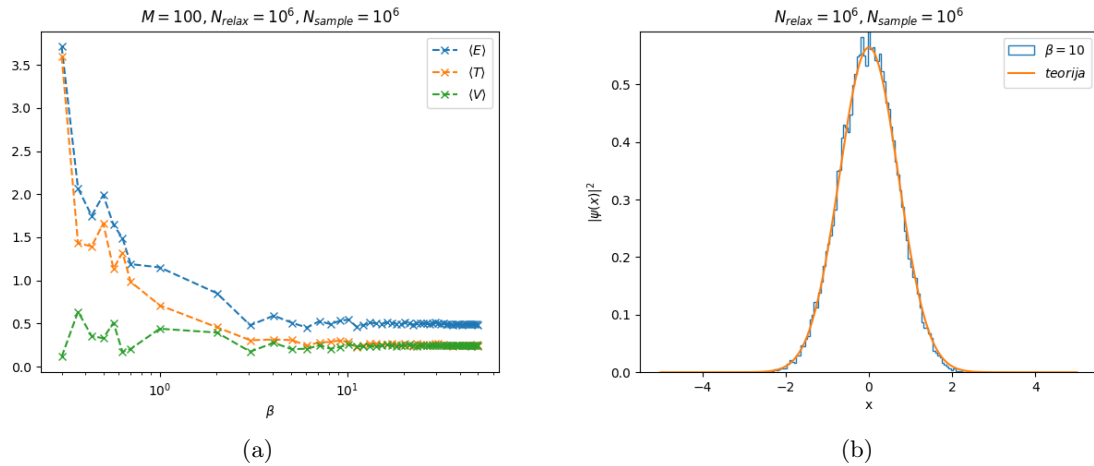


Slika 2: Delež sprejetih potez v odvisnosti od velikosti koraka pri vrednostih M .



Slika 3: a) Odvisnost $\epsilon(M)$. b) Odvisnost $\epsilon(\beta)$, za fitanje podatkom sem uporabil funkcijo `scipy.optimize.curve_fit`.

Z znano odvisnostjo $\epsilon(\beta)$ lahko sedaj dobim energijo v odvisnosti od inverzne temperature (slika 4a). Pri nizkih temperaturah potencialna in kinetična energija prispevata enako k celotni energiji. Pri velikih temperaturah pa predvsem kinetična oz. elastična energija polimera začne divergirati. Preveril sem tudi ali se valovna funkcija osnovnega stanja ujema s teorijo (slika 4b). To sem naredil tako, da sem si ob povprečenju energij shranil tudi stanje polimera in potem narisal histogram. Kot je razvidno je ujemanje precej dobro.



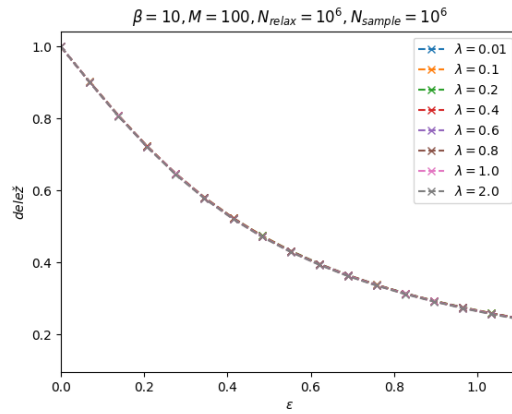
Slika 4: a) Energija harmonskega oscilatorja v odvisnosti od inverzne temperature. b) Verjetnostna gostota osnovnega stanja oscilatorja.

2.2 Anharmonski oscilator

Poglejmo še anharmonski oscilator, Hamiltonijan je sedaj

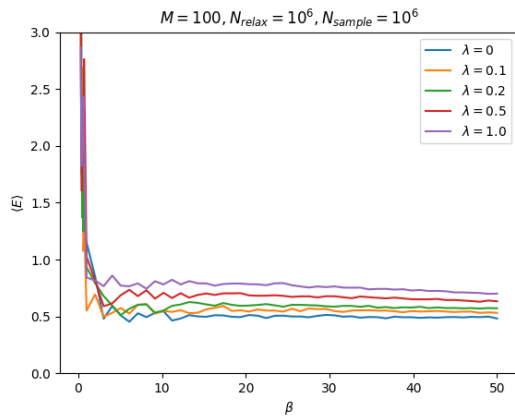
$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} q^2 + \lambda q^4. \quad (10)$$

Najprej sem preveril, če je mogoče kakšna odvisnost $\epsilon(\lambda)$ (slika 5). V danem območju λ ni odvisnosti. Energijo anharmonskega oscilatorja kot funkcijo inverzne temperature prikazuje slika 6a. Energijo osnovnega stanja v odvisnosti od λ prikazuje slika 6b. Analitično rešitev sem dobil preko diagonalizacije Hamiltonijana. Tukaj je razvidno, da je pomembno število korakov v imaginarnem času. Za $M = 100$ ne dobim dobrih rezultatov. Da dobim pravo osnovno stanje pri velikih β mora biti tudi M dovolj velik. Videti je, da se z večanjem M približujem analitični rešitvi.

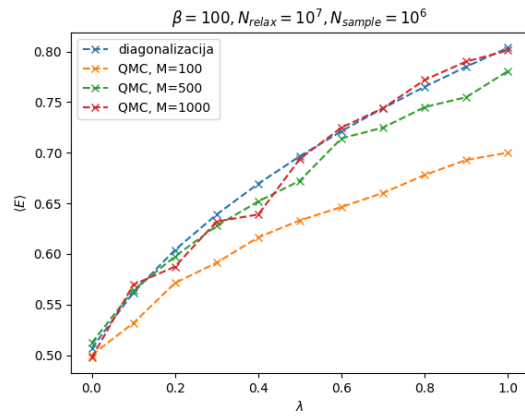


(a)

Slika 5: Delež sprejetih potez v odvisnosti od velikosti koraka pri različnih λ .



(a)



(b)

Slika 6: a) Pričakovana vrednost energije v odvisnosti od inverzne temperature pri različnih vrednostih λ . b) Energija osnovnega stanja pri različnih vrednostih λ .

3 Zaključek

Kvantni problem N dimenzij lahko preslikamo na $N+1$ dimenzionalni klasični problem, v našem primeru je bila to polimerna veriga in uporaba klasičnega Metropolisovega algoritma. Preslikava je uporabna, ko poskušamo ekviparticijsko vsoto kvantnega problema efektivno izračunati na klasičen način.